# 1 超参数初值优化

1.1 GA遗传算法优化GPR超参数初值

1.1.1算法流程

图1 GA优化GPR算法流程图

遗传算法优化GP超参数初值主要分为：GP结构确定（meanfunc,covfunc,likfunc,hyp），GP训练及预测，遗传算法优化初值hyp。遗传算法优化参数的个数等于GP超参数的个数，从而可以确定种群个体的编码长度。引入遗传算法是为了实现优化出最佳的超参数初值。

1.1.2遗传算法实现

遗传算法优化GP回归模型是用遗传算法优化GP回归模型中超参数的初值，使优化后的模型能够更好地进行样本预测。遗传算法优化GP超参数初值的要素包括种群初始化、适应度函数、选择算子、交叉算子和变异算子。

（1）种群初始化

个体编码使用二进制编码，每个个体均为一个二进制串， 由均值、协方差、似然函数3个部分的超参数组成，每个超参数使用M位的二进制编码，连接所有超参数的编码即为单个个体的编码。

（2）适应度函数

此次是为了使GP在预测时，预测值与期望值的残差尽量小，所以选择预测样本的预测值与期望值误差的一范数作为目标函数的输出。

（3）选择算子

选择算子采用随机遍历抽样(sus)

（4）交叉算子

交叉算子采用单点交叉算子。

（5）变异算子

变异以一定概率产生变异基因数，用随机方法选出发生变异的基因。如果所选的基因的编码为1,则变为0；反之，则变为1。

表1 遗传算法运行参数设定

|  |  |  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- | --- | --- |
| 种群大小 | 最大遗传代数 | 变量的二进制位数 | 交叉概率 | 变异概率 | 代沟 |
| 40 | 10 | 10 | 0.7 | 0.01 | 0.95 |

1.2 PSO粒子群算法优化GPR超参数初值

图2 PSO优化GPR算法流程图